SEMINARIO DI ANALISI MATEMATICA
DIPARTIMENTO DI MATEMATICA DELL'UNIVERSITA' DI BOLOGNA

S. GRAFFI

TEORIA CANONICA DELLE PERTURBAZIONI IN MECCANICA QUANTISTICA
II parte

9 APRILE 1987

II. APPLICAZIONE ALL'EQUAZIONE DI SCHRÖDINGER

Si è visto come l'algoritmo della teoria canonica delle perturbazioni permetta di ottenere una forma normale per l'Hamiltoniana quasi-integrabile della forma $H(A,\phi,\varepsilon) = h_0(A) + \varepsilon V(A,\phi)$. La chiave dell'algoritmo sta nel ridurre il problema a una catena ricorsiva di equazioni a derivate parziali lineari e a coefficienti costanti sul toro, che possono essere integrate immediatamente modulo la discussione dei piccoli denominatori. Volendo introdurre un metodo simile per risolvere il problema spettrale di Schrödinger, la condizione necessaria sarà di poter lavorare in una rappresentazione delle regole di commutazione canoniche tale da ridurre almeno un operatore (che sarà preso come punto di partenza per la teoria delle perturbazioni) nella forma di operatore del 1° ordine a coefficienti costanti. La rappresentazione di Bargmann opera proprio questo tipo di riduzione per l'operatore dell'oscillatore armonico.

II.1. La rappresentazione di Bargmann

Sia $T_0(\hbar,w)$ l'operatore di Schrödinger dell'oscillatore armonico non risonante a ℓ gradi di libertà corrispondenti a (1.7). Esplicitamente, T_0 è l'operatore in $L^2(R^\ell)$ definito così:

$$D(T_0(\hbar,\omega)) = H^2(R^\ell)\cap L_2^2(R^\ell),\quad T_0(\hbar)u = \sum_{i=1}^{\ell}\left(-\hbar^2\frac{d^2}{dq_i^2} + \omega_i^2 q_i^2\right)u. \tag{2.1}$$

$$q \to u(q) \in H^2(R^\ell)\cap L_2^2(R^\ell).$$

E' ben noto che $T_0 = T_0^*$, e $\sigma(T_0) = \sigma_d(T_0) = \frac{1}{2}\hbar|\omega| + \omega_1 n_1 h + \omega_\ell n_\ell h = \frac{1}{2}\hbar|\omega| + \langle n,\omega\rangle\hbar$, $n = 0,1,\dots$ Tutti gli autovalori sono semplici per l'indipendenza razionale degli ω_i, $i = 1,\dots,\ell$.

Denotiamo con $\mathscr{F}_\ell$ lo spazio di tutte le funzioni intere $z \to f(z)$ da C^ℓ in C tali che

$$\|f\|_B^2 = \int_{R^{2\ell}} e^{-\langle z,\bar z\rangle/\hbar} \; |f(z)|^2 \, dz \, d\bar z \; < +\infty.$$

$(dz\, d\bar z = \prod_{i=1}^{\ell} dx_i \, dy_i \; , \; z_i = x_i + i\, y_i)$. Allora si ha (Bargmann).

Lemma 2.1. Sia $q \to \psi(q) \in L^2(R^\ell)$. Consideriamo l'applicazione $U : \psi \to U\psi = f(z)$, $f(z) = (U\psi)(z) = \int_{R^\ell} A(z,q) \; \psi(q) dq$,

$$(2.2) \qquad A(z,q) = (\sqrt{\pi}\,\hbar)^{-\ell/2} (\omega_1,\dots,\omega_\ell)^{1/2} \; e^{-[(z^2+\omega q^2)+2\sqrt{2}\langle z,\, \omega q\rangle]/2h}$$

Allora U è unitaria fra $L^2(R^\ell)$ e $\mathscr{F}_\ell$. Si hanno poi le seguenti equivalenze unitarie fra operatori:

$$(2.3) \qquad U T_0(\hbar,\omega) U^{-1} = P_0(\hbar,\omega) + \frac{1}{2}\hbar|\omega|$$

$$(2.4) \qquad U q_i \, U^{-1} = (z_i + \hbar \frac{d}{dz_i}) / \sqrt{2\omega_i}$$

$$(2.5) \qquad U(-i\hbar \frac{d}{dq_i}) U^{-1} = (z_i - \hbar \frac{d}{dz_i}) \sqrt{\frac{2}{\omega_i}}$$

dove $P_0(\hbar,\omega)$ è l'operatore massimale in $\mathscr{F}_\ell$ generato dall'espressione differenziale $\hbar \sum_{i=1}^{\ell} \omega_i \, z_i \frac{d}{dz_i} = h\langle \omega z, \nabla_z \rangle$ e anche le altre espressioni differenziali vanno considerate come operatori massimali.

Ovviamente $\sigma(P_0) = \langle n,\omega\rangle\hbar$, con autofunzioni $c_n z^n = c_{n_1,\dots n_\ell} z_1^{n_1} z_2^{n_2} \dots z_\ell^{n_\ell}$. Riotteniamolo per altre via, che rappresenta il punto di partenza della teoria delle perturbazioni.

Consideriamo in $\mathscr{F}_\ell$ il problema degli autovalori

$$(2.6) \qquad P_0(\hbar,\omega)\psi(z) = E_0 \psi(z)$$

e cerchiamo le autofunzioni sotto la forma $\psi_0(E_0,z) = e^{-\frac{z^2}{2\hbar} + w_0(E_0,z)/\hbar}$. Si ha immediatamente:

$$(2.7) \qquad \langle \omega z, \nabla_z W_0(E_0,z)\rangle - \omega z^2 = E_0$$

il che mostra che le variabili possono essere separate: (2.7) è equivalente a

$$(2.8) \qquad \langle \omega_i z_i, \frac{dW_0^i}{dz_i}(E_0^i,z_i)\rangle - \omega_i z_i^2 = E_0^i \quad , \quad i = 1,\dots,\ell.$$

$$E = E_0^1 + \dots E_0^\ell \, , \quad W_0 = W_0^1 + \dots W_0^\ell .$$

Se ora $z \in C$ indica una qualsiasi degli z_i la (2.8) dà immediatamente $\frac{dW_0}{dz}(E_0,z) = \frac{E_i + \omega z^2}{\omega_i z}$. Poiché $z \mapsto \psi(z)$ deve essere intera, per ogni circonferenza Γ in C che eviti gli zeri di $\psi(z)$ si avrà:

$$\frac{1}{2\pi i}\int_\Gamma \frac{\psi'(E_0,z)}{\psi(E_0,z)}\,dz = \frac{1}{2\pi i\hbar}\int \frac{dW_0(E_0,z)}{dz}\,dz = n_i$$

ma, da quanto precede, $\frac{1}{2\pi i}\int \frac{dW_i(E_0,2)}{dz}\,dz = \frac{E_0}{\omega_i}$ per cui otteniamo la condizione di quantizzazione, cioè lo spettro:

$E_i^0(\hbar) = n_i\omega_i\hbar$, $E_0(\hbar) = \langle n,\omega\rangle\hbar$, $W_i^0 = \log z_i^{n_i}$, $\psi(z,E_0(\hbar)) = (C_{n_1,\dots,n_\ell})z_1^{n_1}\dots z_\ell^{n_\ell}$.

Sia ora $V = V(q) = V(q_1,\dots q_\ell)$ un polinomio qualsiasi in q. Sia $T(\hbar,\varepsilon)$ l'operatore di Schrödinger definito come l'operatore massimale in $L^2(R^\ell)$ definito dall'azione di $T_0(\hbar,\omega) + \varepsilon V(q)$. La sua immagine unitaria in $\mathcal{F}_\ell$ sarà lo operatore $P(\hbar,\varepsilon) + \frac{1}{2}\hbar\,|\omega|$, dove $P(\hbar,\varepsilon)$ è l'operatore massimale generato dalla azione dell'espressione differenziale:

(2.9) $\tilde{P}(\hbar,\varepsilon) = \tilde{P}_0(\hbar,\omega) + \varepsilon V((z + \hbar\, \nabla_z)/\sqrt{2\omega})$;

$$z/\sqrt{2\omega} = (z_1/\sqrt{2\omega_1}, \ldots, z_\ell/\sqrt{z\omega_e}).$$

II.2. La forma normale di Birkhoff per l'operatore di Schrödinger

Consideriamo il problema spettrale in $\mathcal{F}_\ell$ per $P(\hbar,\varepsilon)$

$$P(\hbar,\varepsilon)\psi(z,E,\varepsilon) = E(\hbar,\varepsilon)\psi(z,E,\varepsilon) \tag{2.10}$$

Il lemma fondamentale che riduce l'integrazione di (2.10) a un'eq. di Hamilton-Jacobi con correzioni in $\hbar$, che può essere integrata con il formalismo canonico, è il seguente.

Lemma 2.2. Per ogni fissato $(E,\varepsilon) \in C \times C$ l'equazione (2.10) ammette una soluzione localmente olomorfa in C^ℓ della forma:

$$\psi(z,E,\varepsilon) = e^{[W(z,E,\varepsilon)-z^2/2]/\hbar} \tag{2.11}$$

se e solo se $z \to W(z,E,\varepsilon)$ è una soluzione localmente olomorfa dell'equazione

$$\langle\omega z,\nabla_z W(z,E,\varepsilon)\rangle-\omega z^2+\varepsilon[V(\nabla_z\omega(\cdot)/\sqrt{2\omega} + \sum_{\ell=1}^{N} h^\ell R_\ell(W)] = E(\hbar,\varepsilon) \tag{2.12}$$

dove N è il grado del polinomio V, e $R_\ell(W)$ è un polinomio in W e sulle sue derivate fino all'ordine ℓ, con coefficienti proporzionali alle derivate di V fino al medesimo ordine calcolate in $\nabla_z W$.

Questo lemma permette l'applicazione immediata dell'algoritmo della teoria canonica delle perturbazioni. La sola variante è costituita dall'impiego dello sviluppo di Laurent invece di quello di Fourier. (In realtà, si tratta però della stessa cosa).

Sotto le nostre ipotesi su V, ricordiamo, lo sviluppo di Rayleigh

Schrödinger attorno ad ogni autovalore semplice $E_0(\omega,\hbar) = \hbar\langle n,\omega\rangle + \frac{1}{2}\hbar|\omega|$ di $T_0(\hbar,\omega)$ esiste a tutti gli ordini, cioè:

$$(2.13) \qquad E_0(n,\hbar,\omega) \to \sum_{k=0}^{\infty} \lambda_n^k(\hbar)\varepsilon^k \quad , \quad \lambda_n^0(\hbar) = \langle n,\omega\rangle\hbar$$

Si noti che in questa generalità nulla si può dire sulla convergenza della serie né tantomeno della stabilità degli autovalori di T_0 per $\varepsilon>0$ piccolo. L'unica cosa che si può affermare è l'esistenza della serie termine a termine. Il risultato riguarda proprio la forma della serie, ed è il seguente:

Proposizione. Sia $A\to N_k(A)$ il k-esimo coefficiente della forma normale di Birkhoff per l'Hamiltoniana $h_0(A)+\varepsilon V(A,\phi)$, $h_0(A) = \langle\omega,A\rangle$, V come sopra, dove si assume valida la condizione diofantina (1.25).

Allora $A\to N_k(A)$ è intero $\forall k$, e per ogni k esiste una famiglia di funzioni intere $A\to Q_\ell^k(A)$, $\ell=1,\dots,2KN$, tali che:

$$(2.13) \qquad \lambda_k(n,\hbar) = N_k(n\hbar) + \sum_{\ell=1}^{2kN} \hbar^\ell Q_\ell^k(n\hbar).$$

Cenno di dimostrazione. Si cerca una soluzione di (2.12) sotto forma: $W(E,z,\varepsilon) = W_0 + \varepsilon W_1 + \varepsilon^2 W_2, \dots$ $E_0 = E_0 + \varepsilon E_1, \dots$, essendo note le condizioni iniziali: $\nabla_z W_0 = (\frac{A_1}{z_1} + z^1, \dots, \frac{A_\ell}{z_\ell} + z_\ell)$, $A_1 = n_1\hbar, \dots, A_\ell = n_\ell\hbar$, $E_0 = \langle n,\omega\rangle\hbar$. Si vede immediatamente, sostituendo in (2.12), che per ogni k si ottiene un'equazione della forma:

$$(2.14) \qquad \langle\omega z,\nabla_z\rangle W_k(n,\hbar,z) + Y_k(W_0,\dots,W_{k-1}) + \sum_{\ell=}^{2kN} Z_n^\ell(W_0,\dots W_{k-1})\hbar^\ell = E_k(n,\hbar)$$

che può essere immediatamente risolta per serie di Laurent, perché è a coefficienti costante, la convergenza della serie essendo implicata dall'analiticità e dalla condizione diofantina.

L'equazione (2.14) è ovviamente ricorrente su k, e $\forall k$ $E_k(n,\hbar)$ è la

media del dato precedente, cioè il coefficiente 0 dello sviluppo di Laurent. Non è quindi difficile vedere che vale (2.13); rimane solo da controllare che per $\hbar = 0$ i coefficienti $N_k(A)$ sono proprio quelli della forma normale di Burkhoff. Per far ciò notiamo che per $\hbar=0$ la (2.12) si riduce a:

$$\langle \omega z, \nabla_z W(E,z)\rangle - \omega z^2 + \varepsilon V(\nabla_z W) = E \tag{2.15}$$

e che sostituendo a $W(E,z)$ la funzione $W_0(A,z)$ definita sopra abbiamo $\langle \omega z, \nabla_z W_0(A,z)\rangle - \omega z^2 = \langle \omega, A\rangle \equiv E_0(A)$.

Identificando C^ℓ con $R^{2\ell}$, è immediata la verifica che la trasformazione lineare complessa: $z_i = (\omega_i q_i + i p_i)/\sqrt{2\omega_i}$, $R_i = q_i\sqrt{2\omega_i}$ è canonica. L' inversa è ovviamente $q_i = \frac{R_i}{\sqrt{2\omega_i}}$, $P_i = -i\sqrt{2}_{\,i}(z_i - R_i)$. Osserviamo inoltre che $z_i + \bar{z}_i = R_i$ e che $z_i\bar{z}_i = A_i$, per cui l'Hamiltoniana H_0 scritta nelle variabili z,R è:

$$F_0(z,R) = \sum_{i=1}^{\ell} \omega_i (z_i R_i - z_i^2) \tag{2.16}$$

Pertanto l'eq. di Hamilton-Jacobi per la funzione generatrice $W(A,z)$ della trasformazione canonica che trasforma (2.16) nell'Hamiltoniana $\langle\omega,A\rangle$ si scrive:

$$\sum_{i=1}^{\ell} (\omega_i z_i \partial_{z_i} W(A,z) - z_i^2) = \langle \omega, A\rangle, \tag{2.17}$$

da cui $W = W\,(A,z)$ come sopra, e l'equazione perturbata diventa:

$$\langle \omega z, \nabla_z \omega(A,z,\varepsilon)\rangle - z^2 + \varepsilon V(\nabla_z W/\sqrt{2}\omega) = E(A,\varepsilon)$$

che è (2.15), e la condizione iniziale W_0 è la stessa. Ciò conclude il cenno di prova.

NOTA BIBLIOGRAFICA

Per la rappresentazione di Bargmann, il lavoro originale è:

V. BARGMANN, On a Hilbert space of analytic functions and an associated integral transform.
Comm. Pure Appl. Math., 14, 187-214 (1961).

L'applicazione all'eq. di Schrödinger qui accennata si trova in:

S. GRAFFI e T. PAUL, The Schrödinger Equation and Canonical Perturbation Theory.
Comm. Math. Phys., 108, 25-40 (1987).